液体格子内の一電子スペクトル

I（一次元格子）

広田　　徹（芝浦工大）

（4月21日受理）

§1. 序

最近Random格子内のスペクトルの研究が進み，段々その様子[1]が明らかにされつつある。これを液体格子内の電子に対する一体問題として見ると，方法論的に次の二点が重要であるように思われる。（ポテンシャル自体は別として）

1 — localなポテンシャル配置を規定する分布函数により，スペクトルを正しく導く問題 — 一次元のRandomな体系のスペクトルは数値計算により，求める事が出来る。その結果[2]は，近似計算による結果[3]即ち何らかの平均操作によるものと細部について可成り異っている。[4),1)]このlocalな状態の影響は平均操作からの取扱いを面倒にしている。しかし広沢氏がPhysical Reviewに発表された液体格子内のGap に対する平均操作による計算は[5]数値計算の結果[3]と大要に於て比較的に良い一致を示している事は注目に値しよう。

2 — 三次元の体系に適用出来る方法の問題 —

従来の方法はグリーン函数法[6]をのぞけば，殆んど一次元に限られて居るように思われる。グリーン函数法も，local な配置について足す段になると困難に対面する。

この報告では著者が前に物性に発表した波動函数の平均解からスペクトルを求める方法[7]（本質的にはグリーン函数法と同じである。）を再検討し，格子間隔を Gauss 分布で平均する場合，或範囲の粒子数を一定とする制限をつけると広池氏がTransmission matrix T_N の平均のTrace $T_r\langle T_N\rangle$ より得た積分と同種の積分が得られることを示し，又広池氏が計算した方法とは異った簡単な考えから，スペクトルの式 Gap の式が容易に得られることを示そう。Gap の persistence の条件は広池氏のものと少し異なる。

§ 2.　積分方程式の平均解

一次元の液体格子内の一電子状態を考える。波動方程式を，Volterraの積分方程式の形に書き換えると，

$$\psi(x)=\psi_0(x)+\int_0^x \frac{\sin k(x-\xi)}{k} V(\xi)\psi(\xi)\,d\xi \tag{1}$$

となる。ψ_0 は自由電子の波動函数で$\psi(x)$に対する境界条件を満たすように決める。簡単の為に，ポテンシャル$V(x)$はδ函数で表わされると，

$$V(x)=\kappa_0\sum_i \delta(x-x_i) \tag{2}$$

のようにとる。（δ函数の強さ κ_0は，皆一定とする。従って

$$\psi(x)=\psi_0(x)+\frac{\kappa_0}{k}\sum \sin k(x-x_i)\psi(x_i) \tag{3}$$

上式の逐次級数解を求めると

$$\psi(x)=\psi_0(x)+\frac{\kappa_0}{k}\sum \sin k(x-x_i)\psi_0(x_i)+\left(\frac{\kappa_0}{k}\right)^2\sum_{i>j}\sum$$
$$\times\sin k(x-x_i)\sin k(x_i-x_j)\psi_0(x_j)+\cdots\cdots \tag{4}$$

ここで，ポテンシャル中心の配置について平均をとり，波動函数の平均解を求める。隣り合ったポテンシャル中心間の距離の分布は函数$f(t)$で表わされるとする。Gauss分布ならば

$$f(t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}e^{-\frac{(t-a)^2}{2\sigma^2}} \tag{5}$$

となる。aは平均間隔，σは分布の幅を示すパラメーターである。しかし隣り合わせの間隔が各々独立に，Gauss 分布をするのではなく，一つの制限が存在すると考える。それは，積分方程式の積分範囲（0，x）内のポテンシャル中心の数を一定とし，これをNとする事である。この制限はポテンシャル中心

の配置に対し，一種の長距離相関を導入した事に相当する。

さて，遂次級数(4)に平均操作を施し，無限次迄全部を足し合わせる為に，母函数 $H_n(p,\lambda)$ を定義する。

$$H_n(p,\lambda)=B\Big[\sum_{s=1}^{\infty}\{h_+^s(p)\lambda^s-h_-^s(p)\lambda^s\}\Big]^n\left(\frac{\kappa_0}{k}\right)^{n-1}$$

$$+iA\Big[\sum_{s=1}^{\infty}\{h_+^s(p)\lambda^s-h_-^s(p)\lambda^s\}\Big]^{n-1}\Big[\sum_{s=1}^{\infty}\{h_+^s(p)\lambda^s+h_-^s(p)\lambda^s\}\Big]\left(\frac{\kappa_0}{k}\right)^{n-1} \tag{6}$$

但し A，B は次式に示される係数である。

$$\psi_0(x)=A\cos kx+B\sin kx \tag{7}$$

又

$$h_\pm^s(p)=\frac{1}{2i}\int_{-\infty}^{\infty}\cdots\int dt_1dt_2\cdots dt_s\,e^{i(\pm k+p)(t_1+t_2+\cdots+t_s)}f(t_1)f(t_2)\cdots f(t_s),$$

$$=\frac{1}{2i}(h_\pm)^s \tag{8}$$

上の積分で実際の積分範囲は $t=0\sim\infty$ であるが $t=a$ 附近の Peak が鋭いとして $t=-\infty\sim\infty$ に伸ばしてある。（この仮定は Random 格子の時には適用出来ない。）

母函数 $H_n(p,\lambda)$ を P について Fourier 積分変換の形で表わし，又 λ について，ベキ級数展開をするとき，$e^{ipx}\lambda^N$ の係数をみるならば，これが平均操作を行なった後に於ける遂次級数の n 次の項を表わしている事は容易にわかる。

従って平均解は直ちに

$$\overline{\psi(x)}=\overline{\psi(Na)}$$

$$=\frac{1}{2\pi}\Big[\int_{-\infty}^{\infty}\frac{B\{\sum_{s=1}^{\infty}h_+^s(p)\lambda^s-\sum_{s=1}^{\infty}h_-^s(p)\lambda^s\}+iA\{\sum_{s=1}^{\infty}h_+^s(p)\lambda^s+\sum_{s=1}^{\infty}h_-^s(p)\lambda^s\}}{1-\frac{\kappa_0}{ik}\{\sum_{s=1}^{\infty}h_+^s(p)\lambda^s-\sum_{s=1}^{\infty}h_-^s(p)\lambda^s\}} \tag{9}$$

$$\times e^{-ipNa}dp\Big]_{\lambda\text{のN次の係数}}$$

となる。この積分内の分母を整理して

$$1-\frac{\kappa_0}{ik}\left\{\frac{1}{1-h_+\lambda}-\frac{1}{1-h_-\lambda}\right\}=\frac{1}{(1-h_+\lambda)(1-h_-\lambda)}\{\lambda'^2-2\lambda'\cos\theta+1\} \tag{10}$$

と変形する。但し

$$\lambda'=\sqrt{h_+h_-}\,\lambda\ ,\qquad \cos\theta=\frac{1}{2\sqrt{h_+h_-}}\left\{h_++h_-+\frac{\kappa_0}{2ik}(h_+-h_-)\right\} \tag{11}$$

故に

$$\overline{\psi(Na)}=\frac{1}{2\pi}\left[\int_{-\infty}^{\infty}\frac{B(h_+-h_-)\lambda+iA\{1-(h_++h_-)\lambda\}}{\lambda'^2-2\lambda'\cos\theta+1}e^{-ipNa}dP\right]_{\lambda\text{のN次の}} \tag{12}$$

$$=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\Big[\{B(h_+-h_-)-iA(h_++h_-)\}(h_+h_-)^{\frac{N-1}{2}}\frac{\sin N\theta}{\sin\theta} \tag{13}$$

$$+\,iA(h_+h_-)^{\frac{N+1}{2}}\frac{\sin(N+1)\theta}{\sin\theta}\Big]e^{-ipNa}dp$$

を得る。ここ迄は前の物性に発表したものを書直しただけであるが，次にN→∞の場合に$h_\pm$ の具体的な値に対し，許される解の条件をみてみよう。(13)は広池氏が Transmission matrix の Trace の平均より導いた積分と本質的に同じである。彼は steepest descent の方法で積分を計算したが，N→∞を考えれば積分を行う必要はなく，スペクトルが容易に得られる。次節にそれをみよう。

§3.　スペクトル

(13)の被積分項をみると，Nに依存している項は，Nのべきの形になっている。即ち，それを書き出すと。

$$(h_+h_-)^{\frac{N}{2}}\mu_\pm^N e^{-ipNa}\qquad 但し\ \ \mu_\pm=e^{\pm i\theta} \tag{14}$$

のような形で含まれている。必要とするのはN→∞の漸近形である事に注意す

ると $(h_+h_-)^{\frac{1}{2}}\times\mu_{\pm}\ e^{-ipa}$ のどちらかの絶対値の大きさが，1になり，他のが1より小にならなければ被積分項は発散する。従って

$$|(h_+h_-)^{\frac{1}{2}}\mu\ e^{-ipa}| = |(h_+h_-)^{\frac{1}{2}}\mu| = 1 \tag{15}$$

が満たされねばならない。逆にこの条件が満たされれば $\bar{\Psi}(Na)$ は有限な振幅を持つ振動解となる。従って (15) はスペクトルを決める。

ここで

$$\cos\theta = \frac{1}{2}(\mu_+ + \mu_-) = \cos(\xi + i\eta) \tag{16}$$

と置くと $\mu_{\pm}$ の絶対値の大きさは $e^{\mp\eta}$ であるから，条件 (15) は

$$\eta = -\frac{1}{2}\log|h_+h_-| \tag{17}$$

となる。(11) 及び (16) より

$$\cos(\xi + i\eta) = \frac{1}{2\sqrt{h_+h_-}}\{h_+ + h_- + \frac{\kappa_0}{2ik}(h_+ - h_-)\} \tag{18}$$

が得られる。$h_+ h_-$ が積分変数 p の函数である事に注意する。(18)を実数部分と虚数部分に分け，その両式より p を消去するとスペクトルを表現する式が得られる事になる。f(t)が Gauss 分布(5)ならば

$$h_{\pm}(p) = e^{i(\pm k+P)a - \frac{\sigma^2(\pm k+P)^2}{2}} \tag{19}$$

であるので

$$\eta = \frac{\sigma^2(k^2+P^2)}{2} = \frac{\varepsilon}{2} + \frac{\sigma^2P^2}{2}\ ,\quad \varepsilon = \sigma^2k^2 \tag{20}$$

$$\begin{aligned}\cos(\xi + i\eta) &= \cos(ka + i\sigma^2kP) + \frac{\kappa_0}{2k}\sin(ka + i\sigma^2kP) \\ &= \frac{\cos(ka + \beta + i\sigma^2kP)}{\cos\beta}\end{aligned} \tag{21}$$

但し

$$\tan\beta = -\frac{\kappa_0}{2k} \tag{22}$$

従って

$$\cos\xi\cosh\left(\frac{\varepsilon}{2}+\frac{\sigma^2P^2}{2}\right) = \frac{\cos(ka+\beta)}{\cos\beta}\cosh\sigma^2kP \tag{23}$$

$$\sin\xi\sinh\left(\frac{\varepsilon}{2}+\frac{\sigma^2P^2}{2}\right) = \frac{\sin(ka+\beta)}{\cos\beta}\sinh\sigma^2kP \tag{24}$$

となり，上の二式よりPを消去すればよい。ξの実数値に対し，kの実数解が存在すれば許された状態を表わし，ξの虚数値に対しkの実数解が見出されれば禁止帯の中の状態となる。$\xi = n\pi$（n：整数）がGap の edgeに対応する事が予想される。(24) で $\xi = n\pi$ と置くと，P＝0が必要とされる。従って (23) より

$$\pm\cosh\left(\frac{\varepsilon}{2}\right) = \frac{\cos(ka+\beta)}{\cos\beta} = \cos ka + \frac{\kappa_0}{2k}\sin ka \tag{25}$$

が得られ，Gap の幅が $\varepsilon = \sigma^2k^2$ の函数として示される事になる。Gap が消える条件は，明らかに

$$\cosh\frac{\varepsilon}{2} = \frac{1}{\cos\beta} \tag{26}$$

となり，$\varepsilon \ll 1$ ならば

$$\varepsilon = \sigma^2k^2 = 2\sin\beta \tag{27}$$

となり，この時のσをσ_{max}とすると，広池氏が得たσ_{max}より更に$\sqrt{2}$だけ大きくなる。

ここで，(25) が Gap の edge を与えているかどうかをchequeしてみよう。さて(25)が，$n(\xi = n\pi)$ の1個の整数値に対し，解を持つとする2つの解がある事は函数形より明らかである。この解を k_1，k_2 とする。この k_1 と k_2

の間の任意の値を k_3 ，外の値を k_4 とすると

$$\left|\frac{\cos(k_3 a+\beta_3)}{\cos\beta_3}\right| > \left|\frac{\cos(k_1 a+\beta_1)}{\cos\beta_1}\right|$$
$$\left|\frac{\cos(k_4 a+\beta_4)}{\cos\beta_4}\right| < \left|\frac{\cos(k_1 a+\beta_1)}{\cos\beta_1}\right| \tag{28}$$

が成立する。従って，(23) と (28) より

$$|\cos\xi| > \left|\frac{\cosh \sigma^2 k_3 P}{\cosh\left(\frac{\varepsilon_3}{2}+\frac{\sigma^2 P^2}{2}\right)}\right|\left|\frac{\cos(k_1 a+\beta_1)}{\cos\beta_1}\right|$$
$$> \frac{\cosh \sigma^2 k_3 P}{\cosh\left(\frac{\varepsilon_3}{2}+\frac{\sigma^2 P^2}{2}\right)}\cosh\frac{\varepsilon_1}{2} > 1 \quad .$$

が得られる事になる。即ち $\cos\xi$ は k_3 に対しては，Pの小さな値に対し，1より大になり禁止帯の中にある。 k_4 に対しては，不等号が逆になり ξ の実数値が存在し得る。

このように積分 (13) が有限である条件としてGapが容易に得られるが，このようにして得られるGap の幅は数値計算或いは，Saxon Hntner定理[8)]から予想されるものより，広く出る傾向があるようである。これには2つの原因が考えられる。その一つは，ここで行なった平均に対する制限である。即ち最隣接ポテンシャル中心の間隔に対する分布を数値計算のものと同じにしてもこの制限がある為に，ポテンシャル中心の分布は等しくはないという点である。恐らく，分布の尾は可成り速やかに消えていると思われる。(制限無しでは，Gap が生じないのである。数値計算の場合と異なるわけである) もう一つは local level の問題である。これらの問題の議論は，多次元の取扱と共に次に報告したい。

文　　献

1) J. Hori, "Disordered Lattices" Pergamon (in Press).

2) -3) R. Landaner & J. C. Helland, J. Chem. Phys. 22 1655 (1954)

A. P. Robarts & R. E. B. Makinson, Proc. Phys. Soc. A79 630(1962)

R. L. Agacy & R.E. Borland, Proc. Phys. Soc. 84 1017(2964)

S. Takeno, Prog. Theor. Phys. 28 631(1962)

H. L. Frisch & S. P. Doyd, Phys. Rev. 120 1175(1960)

R. Eisenschitz & P. Dean, Proc. Phys. Soc. 70 713(1957)

4) H. Matsuda, Prog. Theor. Phys. 31 161(1964)

5) K. Hiroike, Phys. Rev. 138 A422(1965)

6) T. Matsubara & Y. Toyozawa, Tech. Rep. ISSP A24 (1961)

F. Yonezawa, Prog. Theor. Phys. 31 357(1964)

7) T. Hirota, Bussei kenkyu 2 119(1964)

8) D.S. Saxon & R.A. Hutner, Philips Rep 4 81 (1949)

H. Matsuda & K. Okada, Prog. Theor. Phys. 34 539 (1965)